

Institut für Reaktorwerkstoffe
KERNFORSCHUNGSANLAGE JÜLICH
des Landes Nordrhein-Westfalen

DIE ELASTISCHE INSTABILITÄT
EINER REIN - HARMONISCHEN
KRISTALLTHEORIE

von

Wolfgang Ludwig

JÜl - 39 - RW

Februar 1962

Sonderdruck

aus Zeitschrift für Physik 164, 490—492 (1961) Springer-Verlag, Berlin · Göttingen · Heidelberg



Berichte der Kernforschungsanlage Jülich - Nr. 39

Institut für Reaktorwerkstoffe Jül - 39 - RW

Dok.: CRYSTAL PHYSICS * DK 548.0 : 53

Zu beziehen durch: ZENTRALBIBLIOTHEK der Kernforschungsanlage Jülich,
Jülich, Bundesrepublik Deutschland

Zeitschrift für Physik 164, 490—492 (1961)

Aus dem Werkstoffinstitut der Kernforschungsanlage Jülich

**Die elastische Instabilität
einer rein-harmonischen Kristalltheorie**

Von

WOLFGANG LUDWIG*

(Eingegangen am 18. Juli 1961)

* Adresse: Aachen, Muffeter Weg 3.

It is shown, that, because of the rotational invariance of the potential energy, a purely-harmonic theory leads to an elastically isotropic, but unstable crystal.

In einer früheren Arbeit¹ (im folgenden mit I bezeichnet) wurden aus der Invarianz der potentiellen Energie eines Kristalls gegenüber Drehungen gewisse Bedingungen für die Kopplungsparameter (K.P.) hergeleitet. Mit Hilfe dieser Rotationsbedingungen soll gezeigt werden, daß das Vorhandensein anharmonischer Terme (K.P. 3. Ordnung und höhere) für die elastische Stabilität von Kristallen notwendig ist.

Die K.P. sind durch Entwicklung der potentiellen Energie nach kleinen Auslenkungen q_i^m aus mittleren Lagen \mathfrak{R}^m definiert^{**}:

$$\Phi = \Phi_0 + \sum_i \Phi_i^m q_i^m + \frac{1}{2} \sum_{i,j} \Phi_{ij}^{mn} q_i^m q_j^n + \frac{1}{6} \sum_{i,j,k} \Phi_{ijk}^{mnp} q_i^m q_j^n q_k^p + \dots \quad (1)$$

Die Rotationsbedingungen verknüpfen die K.P. ν -ter Ordnung mit denen $(\nu+1)$ -ter Ordnung und besagen für $\nu=0, 1, 2$, daß die Größen

$$\sum_m \Phi_i^m X_k^m; \quad \sum_m \Phi_{ij}^{mn} X_k^m + \Phi_i^n \delta_{jk}; \quad (2a, b)$$

$$\sum_m \Phi_{ijl}^{mnp} X_k^m + \Phi_{ji}^{np} \delta_{kl} + \Phi_{il}^{np} \delta_{jk} \quad (2c)$$

symmetrisch in i und k sein müssen. Aus diesen Bedingungen lassen sich für endliche Kristalle die sog. Kun-Huang-Bedingungen² ableiten, für unendliche Kristalle folgen sie daraus durch Extrapolation (I. 4. 11 b).

Für eine *rein-harmonische* Theorie (alle K.P. 3. Ordnung Φ_{ijk}^{mnp} und höhere verschwinden) folgt nun aus (2c)

$$\Phi_{ji}^{np} \delta_{kl} + \Phi_{il}^{np} \delta_{jk} = \Phi_{jk}^{np} \delta_{il} + \Phi_{kl}^{np} \delta_{ij}. \quad (3)$$

^{**} Für Abkürzungen und Symbole vgl. man I.

¹ LEIBFRIED, G., u. W. LUDWIG: Z. Physik **160**, 80 (1960). Zu denselben Ergebnissen kommt L. T. HEDIN: Arkiv Fysik **18**, 369 (1960).

² HUANG, K.: Proc. Roy. Soc. Lond. A **203**, 178 (1950).

Diese Beziehung läßt sich nur mit

$$\Phi_{ij}^{mn} = \varphi^{mn} \delta_{ij} \quad (4)$$

erfüllen. Der Kun-Huang-Tensor (I. 4. 10) wird damit

$$\hat{C}_{ij,kl} = -\frac{1}{2V_z} \sum_{\mathfrak{h}} \varphi^{0\mathfrak{h}} X_k^{\mathfrak{h}} X_l^{\mathfrak{h}} \delta_{ij} = \varrho_{kl} \delta_{ij}. \quad (5)$$

Die Kun-Huang-Bedingung² (I. 4. 11 b) lautet dann mit den Spannungen (I. 4. 7) $C_{kl} = \frac{1}{V} \sum_{\mathfrak{m}} \Phi_k^{\mathfrak{m}} X_l^{\mathfrak{m}}$

$$(\varrho_{kl} - C_{kl}) \delta_{ij} = (\varrho_{ij} - C_{ij}) \delta_{kl}, \quad (6)$$

was wiederum nur für

$$\varrho_{kl} - C_{kl} = \alpha \delta_{kl} \quad (7)$$

erfüllt ist.

Für die elastischen Konstanten (I. 3. 8 a) resultiert

$$C_{ik,jl} = \alpha (\delta_{ij} \delta_{kl} + \delta_{kj} \delta_{il} - \delta_{ik} \delta_{jl}), \quad (8a)$$

oder speziell in der Voigtschen Indizierung ($ik = 11, 22, 33, 23, 31, 12 \rightarrow \alpha = 1, 2, 3, 4, 5, 6$)

$$\left. \begin{aligned} c_{11} &= c_{22} = c_{33} = \alpha, \\ c_{12} &= c_{23} = c_{31} = -\alpha, \\ c_{44} &= c_{55} = c_{66} = \alpha, \\ \text{alle anderen } c_{\alpha\beta} &= 0. \end{aligned} \right\} \quad (8b)$$

Diese Beziehungen besagen elastische Isotropie mit dem Schubmodul

$$c_{44} = \frac{1}{2} (c_{11} - c_{12}) = \alpha \quad (9a)$$

und dem Kompressionsmodul

$$K = \frac{1}{3} (c_{11} + 2c_{12}) = -\frac{1}{3} \alpha. \quad (9b)$$

(Die Laméschen Konstanten sind $\lambda = -\alpha$, $\mu = \alpha$.) Gln. (9) bedeuten jedoch elastische Instabilität, da entweder

$$\text{oder} \quad \left. \begin{aligned} c_{44} &< 0 \quad \text{und} \quad K > 0 \\ c_{44} &> 0 \quad \text{und} \quad K < 0 \end{aligned} \right\} \quad (10)$$

ist. Die Stabilitätsbedingung³ für ein elastisches Medium verlangt aber, daß $c_{44} > 0$ und $K > 0$ sind.

³ BORN, M.: Proc. Cambridge Phil. Soc. **36**, 160 (1940).

Ein *rein-harmonisches* Modell liefert also einen *elastisch-isotropen*, aber *instabilen* Kristall. Für die elastische Stabilität sind anharmonische Terme in der potentiellen Energie (1) notwendig.

Hiernach sieht es zunächst so aus, als ob die übliche harmonische Theorie nicht brauchbar wäre. Das ist jedoch nicht der Fall. Man kann in guter Näherung die Rotationsbedingung (2c) vernachlässigen, wenn man eine harmonische Theorie aufbaut, denn die durch (2c) geforderte „notwendige“ Anharmonizität liefert Effekte, die fast immer um eine Größenordnung kleiner sind als die „echten anharmonischen Effekte“⁴.

Aus der Notwendigkeit anharmonischer Terme läßt sich eine qualitative Aussage über die Größenordnung elastischer Konstanten dritter Ordnung $C_{ik,jl,rs}$ ableiten. Der „notwendige“ Term $\sum_m \Phi_{ijkl}^{mnp} X_k^m$ in (2c) muß von der Größenordnung der K.P. 2. Ordnung sein. Hieraus folgt unmittelbar, daß wenigstens eines der $C_{ik,jl,rs}$, die nach (I. 3. 5 b) und (I. 3. 8 b) aus den K.P. 3. Ordnung berechnet werden können, dem Betrage nach etwa gleich den elastischen Konstanten 2. Ordnung $C_{ik,jl}$ ist. Da die „echte“ Anharmonizität jedoch im allgemeinen um einen Faktor 10 größer ist als die durch die Stabilität geforderte „notwendige“ Anharmonizität (vgl. ⁴), sollten auch wenigstens einige $C_{ik,jl,rs}$ dem Betrage nach größer sein als die $C_{ik,jl}$. Wo Messungen darüber vorliegen, ist das auch erfüllt. Eine Entwicklung der elastischen Energiedichte nach Verzerrungen wie in (I. 5. 4) ist natürlich dann immer noch sinnvoll, wenn nur die Verzerrungen genügend klein sind.

Die vorstehenden Betrachtungen gelten wie in I für parameterfreie Gitter, bei denen sich die Atome als Massenpunkte behandeln lassen. Man darf aber erwarten, daß für nicht-primitive Gitter ähnliche Aussagen möglich sind.

⁴ LEIBFRIED, G., u. W. LUDWIG: Theory of Anharmonic Effects in Crystals. In: Solid State Physics, Bd. 12. S. 275, 1961.